ZEITSCHRIFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE

KRISTALLGEOMETRIE, KRISTALLPHYSIK KRISTALLCHEMIE

BEGRÜNDET VON P. v. GROTH

HERAUSGEGEBEN VON

G. E. BACON · M. J. BUERGER · F. LAVES

G. MENZER · I. N. STRANSKI

BAND 144

Mit 106 Figuren im Text

WIESBADEN 1976

AKADEMISCHE VERLAGSGESELLSCHAFT

PRINTED IN GERMANY

© Akademische Verlagsgesellschaft Wiesbaden 1976. — Printed in Germany. — Die in dieser Zeitschrift veröffentlichten Beiträge sind urheberrechtlich geschützt. Übersetzung, Nachdruck, Vervielfältigung auf photomechanischem oder ähnlichem Wege oder im Magnettonverfahren, Vortrag, Funk- und Fernsehsendung sowie Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen — auch auszugsweise — bleiben vorbehalten. All rights reserved (including those of translations into foreign languages). No part of this issue may be reproduced in any form, by photoprint, microfilm or any other means without written permission from the publishers. Werden von einzelnen Beiträgen oder Teilen von ihnen einzelne Vervielfältigungsstücke im Rahmen des § 54 UrhG hergestellt und dienen diese gewerblichen Zwecken, ist dafür eine Vergütung gem. den gleichlautenden Gesamtverträgen zwischen der Verwertungsgesellschaft Wissenschaft GmbH (ehemals Inkassostelle für urheberrechtliche Vervielfältigungsgebühren GmbH), 6 Frankfurt/Main, Großer Hirschgraben 17—21, und dem Bundesverband der Deutschen Industrie e. V., dem Gesamtverband der Versicherungswirtschaft e. V., dem Bundesverband deutscher Banken e. V., dem Deutschen Sparkassen- und Giroverband und dem Verband der Privaten Bausparkassen e. V., an die VG Wissenschaft zu entrichten. Die Vervielfältigungen sind mit einem Vermerk über die Quelle und den Vervielfältiger zu versehen. Erfolgt die Entrichtung der Gebühren durch Wertmarken der VG Wissenschaft, so ist für jedes vervielfältigte Blatt eine Marke im Wert von DM 0,40 (bzw. DM 0,15) zu verwenden.
Herstellung: Wiesbadener Graphische Betriebe GmbH, Wiesbaden

Inhaltsverzeichnis des 144. Bandes

Heft 1 und 2

Karin Aurivillius and *Claes Stålhandske* (Lund), A neutron-diffraction study of trimercury(II)dihydroxide disulphate monohydrate, $Hg_3(OH)_2(SO_4)_2 \cdot H_2O$ 1

Ekkehart Tillmanns (Mainz) und *Inge Wendt* (Bochum), Die Kristallstruktur eines Bariumtitanlithiumoxids, $Ba_2Ti_{9,25}Li_3O_{22}$ 16

W. J. Mortier, J. J. Pluth and *J. V. Smith* (Chicago), Crystal structure of natural zeolite offretite after carbon monoxide adsorption 32

H. Toraya, S. Iwai, F. Marumo, M. Daimon and *R. Kondo* (Tokyo), The crystal structure of tetrasilicic potassium fluor mica, $KMg_{2.5}Si_4O_{10}F_2$ 42

A. N. Bagshaw (Nedlands, Western Australia), Diverse structures based on the *Fd3m* space group 53

N. V. Pavel, C. Quagliata and *N. Scarcelli* (Roma), Minimization programs for potential energy calculations in crystals and isolated molecules and macromolecules 64

R. Masse, I. Tordjman et *A. Durif* (Grenoble), Affinement de la structure cristalline du monophosphate d'argent Ag_3PO_4. Existence d'une forme haute témperature 76

H. Aust, H. Völlenkle und A. *Wittmann* (Wien), Die Kristallstruktur der Hoch- und der Tieftemperaturform von $CaGe_2O_5$ 82

E. Kendi and *D. Ülkü* (Ankara), The crystal structure of cadmium-nickel dioxane clathrate $Cd(NH_3)_2 \cdot Ni(CN)_4 \cdot 2C_4H_8O_2$ 91

D. P. Sinha, Suresh Chandra and *Saligram Singh* (Patna), The elastic constants of indium single crystals by diffuse x-ray reflections 97

Gustav Szekely (Wien), The anisotropic thermal expansion of the hydrogen-bonded complex between 1-methylthymine and 9-methyladenine. . 102

J. Borrajo, E. L. Varetti, P. J. Aymonino and *A. M. Silva* (La Plata), Crystallographic data for mercuric chloride perfluoromethanethiolate, $HgCl(SCF_3)$ 110

H. J. Berthold, J. M. Molepo und *R. Wartchow* (Hannover), Die Kristallstruktur des $AgClO_4$ 116

B. Ribár and *N. Milinski* (Novi Sad), The crystal structure of nickel nitrate dihydrate, $Ni(NO_3)_2 \cdot 2H_2O$ 126

B. Ribár and *N. Milinski* (Novi Sad), *R. Herak, I. Krstanovič* and *S. Djurič* (Beograd), The crystal structure of cobalt nitrate dihydrate, $Co(NO_3)_2 \cdot 2H_2O$ 133

Vorläufige Mitteilungen—Preliminary notices

V. Šubrtová, V. Petříček, A. Línek and *J. Ječný* (Prague), The crystal and molecular structure of 8,8′-$OCH_3(B_9C_2H_{10})_2Co$ 139

J. Hašek and *K. Huml* (Prague), Crystal data for macrocyclic polyethers $C_{29}H_{40}O_{10}NSK$ and $C_{29}H_{40}O_{10}NSRb$ 142

D. Lazar, B. Ribár, K. Popov-Pergal and *M. Pergal* (Novi Sad), Crystal data for: 2,4,5-trioxotetrahydro-1,3-thiazole, C_3HNO_3S, 2,4-dioxo-3-phenyltetrahydro-1,3-thiazole, $C_9H_7NO_2S$, and 3-(3,4-dichlorophenyl)-2,4-dioxotetrahydro-1,3-thiazole, $C_9H_5Cl_2NO_2S$ 144

Heft 3 und 4

Yasuhiro Kudoh and *Y. Takéuchi* (Tokyo), The superstructure of stannoidite 145

Nobuhiko Haga and *Yoshio Takéuchi* (Tokyo), Neutron diffraction study of ilvaite 161

Yozo Chatani and *Sadao Nakatani* (Osaka), Crystal structure of the monoclinic adduct of thiourea with 2,3-dimethylbutadiene 175

Bernhard Berking (München), Die Verfeinerung der Kristallstruktur eines lunaren Plagioklases An_{90} 189

W. Prandl (München), Die Basisvektoren der irreduziblen Darstellungen für die Granatstruktur und ihre Anwendung bei magnetischen Strukturuntersuchungen 198

W. Schäfer and *G. Will* (Bonn), The crystal structures of ErB_4 and DyB_4 studied by neutron diffraction 217

C. Giacovazzo, E. Scandale and *F. Scordari* (Bari), The crystal structure of chlorotionite, $CuK_2Cl_2SO_4$ 226

H. Weitzel (Darmstadt), Kristallstrukturverfeinerung von Wolframiten und Columbiten 238

R. V. Anantha Murthy and *B. V. R. Murthy* (Madras), Crystal and molecular structure of bis(2-imino-4-oxo-1,3-thiazolidine) silver(I) perchlorate 259

K. Weber (Berlin), Läßt sich die Indizierung eines Pulverdiagrammes als zahlentheoretisches Problem behandeln? 274

Mitsuyoshi Kimata (Tokyo), The determination of the glancing angle and spacing for each spot on an upper-level equi-inclination Weissenberg photograph 283

Vorläufige Mitteilung—Preliminary notice

B. Kołakowski and *A. Kołakowski* (Warsaw), Lattice parameters and space group of *p*-bromphenoxy-acetimino methyl ether and N-methyl-4-bromphenoxy acetamide crystals 287

Heft 5 und 6

Kazuaki Iishi (Hannover), The analysis of the phonon spectrum of α quartz based on a polarizable ion model 289

Bruno Guigas and *W. E. Klee* (Karlsruhe), On the generation of plane nets 304

V. Divjaković, *A. Edenharter*, *W. Nowacki* und *B. Ribár* (Bern), Die Kristallstruktur von Tetraaquo-Berylliumnitrat, $Be(OH_2)_4(NO_3)_2$ 314

V. Divjaković und *W. Nowacki* (Bern), Die Kristallstruktur von Imhofit, $Tl_{5,6}As_{15}S_{25,3}$ 323

B. Ribár and *D. Petrović* (Novi Sad) and *S. Djurič* and *I. Krstanovič* (Beograd), The crystal structure of hexaquomanganese nitrate, $Mn(OH_2)_6(NO_3)_2$ 334

P. C. Christidis and *P. J. Rentzeperis* (Thessaloniki), The crystal structure of rhombohedral $Fe_2(SO_4)_3$ 341

U. Deserno (München) und *S. Haussühl* (Köln), Lineare und nichtlineare optische Eigenschaften von hexagonalem $Ba(NO_2)_2 \cdot H_2O$ 353

Kevin L. Brown (Petone, New Zealand) and *Frank W. Dickson* (Stanford, California), The crystal structure of synthetic christite, $HgTlAsS_3$ . . 367

Cl. C. Venetopoulos and *P. J. Rentzeperis* (Thessaloniki), Redetermination of the crystal structure of clinohedrite, $CaZnSiO_4 \cdot H_2O$ 377

Sergio Deganello (Marburg), Study of the oxidation of triphylite in the range 20° to 900°C 393

Wolfgang Friedrich Müller (Frankfurt), On stacking disorder and polytypism in pectolite and serandite 401

G. K. Chadha (München), Crystal structure of a PbI_2 polytype 48*R* 409

Kalyani Mankad, *T. C. Patel*, *K. C. Patel* and *R. D. Patel* (Vallabh Vidyanagar), Crystal data for α,α'-dichloromalonic acid di *p*-toluidide 413

Jahresversammlung der Schweizerischen Gesellschaft für Kristallographie, Referate der Kurzvorträge 415

16. Diskussionstagung der Arbeitsgemeinschaft Kristallographie der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft, der Deutschen Physikalischen Gesellschaft und der Gesellschaft Deutscher Chemiker, Referate der Kurzvorträge 424

Autorenregister zu Band 144 443

Sachregister zu Band 144 447